

Document made available under the Patent Cooperation Treaty (PCT)

International application number: PCT/JP05/003517

International filing date: 02 March 2005 (02.03.2005)

Document type: Certified copy of priority document

Document details: Country/Office: JP
Number: 2004-058443
Filing date: 03 March 2004 (03.03.2004)

Date of receipt at the International Bureau: 28 April 2005 (28.04.2005)

Remark: Priority document submitted or transmitted to the International Bureau in compliance with Rule 17.1(a) or (b)



World Intellectual Property Organization (WIPO) - Geneva, Switzerland
Organisation Mondiale de la Propriété Intellectuelle (OMPI) - Genève, Suisse

日 本 国 特 許 庁
JAPAN PATENT OFFICE

10.3.2005

別紙添付の書類に記載されている事項は下記の出願書類に記載されている事項と同一であることを証明する。

This is to certify that the annexed is a true copy of the following application as filed with this Office.

出 願 年 月 日
Date of Application: 2 0 0 4 年 3 月 3 日

出 願 番 号
Application Number: 特 願 2 0 0 4 - 0 5 8 4 4 3

パリ条約による外国への出願
に用いる優先権の主張の基礎
となる出願の国コードと出願
番号

The country code and number
of your priority application,
to be used for filing abroad
under the Paris Convention, is

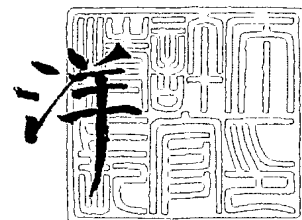
J P 2 0 0 4 - 0 5 8 4 4 3

出 願 人
Applicant(s): 独 立 行 政 法 人 食 品 総 合 研 究 所

2 0 0 5 年 4 月 1 4 日

特 許 庁 長 官
Commissioner,
Japan Patent Office

小 川



【書類名】 特許願
【整理番号】 SHOKU04-02
【提出日】 平成16年 3月 3日
【あて先】 特許庁長官 殿
【国際特許分類】 G01J 05/00
【発明者】
 【住所又は居所】 茨城県土浦市永国東町 4 3 - 1 5
 【氏名】 河野 澄夫
【発明者】
 【住所又は居所】 茨城県つくば市竹園 2 丁目 2 0 番地 4
 竹園ハウス 6 0 4 号
 【氏名】 サランウォング シリンナパー
【特許出願人】
 【識別番号】 501407218
 【氏名又は名称】 独立行政法人 食品総合研究所
【代理人】
 【識別番号】 100085257
 【弁理士】
 【氏名又は名称】 小山 有
【手数料の表示】
 【予納台帳番号】 888888
 【納付金額】 21,000円
【提出物件の目録】
 【物件名】 特許請求の範囲 1
 【物件名】 明細書 1
 【物件名】 図面 1
 【物件名】 要約書 1

【書類名】 特許請求の範囲**【請求項 1】**

基準とする分光装置である親機にて測定した標準物質のスペクトルを、親機に類似した他の分光装置である子機で測定したその標準物質のスペクトルから差し引くことにより親機と子機の差スペクトルを求め、その差スペクトルを子機で測定する個々の測定対象試料のスペクトルから差し引くことにより、子機の応答特性を親機の応答特性に一致させることを特徴とする分光装置応答特性の平準化法。

【請求項 2】

請求項1に記載の分光装置応答特性の平準化法において、前記分光装置を果実糖度選別機に配置したことを特徴とする分光装置特性の平準化法。

【請求項 3】

請求項1に記載の分光装置応答特性の平準化法において、前記標準物質のスペクトルは、測定対象試料のスペクトルあるいは二次微分スペクトル、またはそれらの平均スペクトルであることを特徴とする分光装置応答特性の平準化法。

【請求項 4】

請求項1に記載の分光装置応答特性の平準化法において、前記標準物質のスペクトルは、測定対象試料と光学的密度が類似した物質のスペクトルあるいは平均スペクトルであることを特徴とする分光装置応答特性の平準化法。

【書類名】明細書

【発明の名称】分光装置応答特性の平準化法

【技術分野】

【0 0 0 1】

本発明は、光源・分光器・センサーの応答特性の違いから生ずる分光装置応答特性の違いを補正する分光装置応答特性の平準化法に関する。

【背景技術】

【0 0 0 2】

製品の量産化にあたり、複数の検査装置の測定誤差・バラツキを抑えるために、専用治具などを使って検査装置を個々に調整することはよく行われている。しかし、前記検査装置の校正において、チェックポイントが多いと作業時間および所要工数がかかり、最終的に調整コストが製品価格に大きな影響を与える。よって、調整を要するチェックポイントは必要最低限に留めることが望ましいが、精度を要求される製品の場合には工夫が必要である。

【0 0 0 3】

例えば、特許文献 1 においては、光ディスクの検査装置で検査対象光ディスクの再生において、再生信号の測定値と真値の相関関係を表す相対関係式として

$$\text{真値 } Y_i = \text{ゲイン補正係数 } a_j \times \text{測定値 } X_i + \text{オフセット補正係数 } b_j \quad (a)$$

X_i : 再生信号の測定値

Y_i : 再生信号の真値

a_j : 各区分でのゲインを補正するためのゲイン補正係数

b_j : 各区分でのオフセットを補正するためのオフセット補正係数

を記載している。そして、前記ゲイン補正係数 a_j 及び前記オフセット係数 b_j を区分毎に求めた。更に、前記演算手段を使って求めた校正値に基づいて測定手段を校正して検査対象光ディスクを検査する方法について記載されている。

【特許文献 1】特開 2 0 0 3 - 1 8 9 7 4 4 0 号公報

【発明の開示】

【発明が解決しようとする課題】

【0 0 0 4】

しかしながら、検査対象が光ディスクよりも複雑な周波数（波長）特性を持つ場合、例えば分散型近赤外装置を使い、7 0 0 n m ~ 1 1 0 0 n m の波長範囲においてリングの反射スペクトルを測定する場合は、非測定物の個体差が大きいという光ディスクには無い問題点がある。

特許文献 1 にあった近似式（a）を使ってみたが、表 1 の線形補正データから見ても明らかなように、適切な線形補正パラメーターを見つけることは出来なかった。

更に複雑な多項式を用いた近似式（b）

$$y = k_0 + k_1 x + k_2 x^2 \quad (b)$$

を使った場合も、表 1 の多項式補正データを見て明らかなように、適切な多項式パラメーターを見つけることは出来なかった。

【0 0 0 5】

【表 1】

調整ライン条件	キャリブレーション方法			
	MLR		PLS	
	SEP	バイアス	SEP	バイアス
無調整	0.34	-0.42	0.35	-0.53
700-1100nm 線形補正	0.34	-1.07	0.32	-1.31
700-1100nm 多項式補正	0.34	-0.48	0.31	-1.14
850-1050nm 線形補正	0.34	-0.46	0.32	-1.24
850-1050nm 多項式補正	0.34	0.25	0.31	-1.06

(注 1) 分析アルゴリズム

MLR (Multiple Linear Regression)

PLS (Partial Least Squares)

(注 2)

SEP: 残差標準誤差 (バイアス補正された予測値の標準誤差)

バイアス: 近赤外分光法による予測値と化学分析値との差の平均

【0006】

また、近赤外分光法を用いて定量分析・定性分析を行うためのキャリブレーションモデル (以後、モデルという。) において同モデルを開発した機器から類似した他の機器に移設する場合、分光装置応答特性の違いにより誤差が発生する。定量分析の場合、補正方法としてモデルのバイアス補正という方法があるが、この方法は推定結果の補正であり、モデルごとの補正が必要で、労力が必要であるとともに作業が煩雑である。

一方、定性分析の場合の補正方法はまだ開発されていない。

【課題を解決するための手段】

【0007】

本発明は親機で開発したモデルを子機で使用できるようにするため、分光装置応答特性の違いから発生するスペクトルの歪みを補正する分光装置応答特性の平準化法を提供することを目的とする。

上記目的を達成するため本発明に係る分光装置応答特性の平準化法は、子機で測定した標準物質のスペクトル、例えば 2 次微分スペクトルから親機で測定した同物質のスペクトル、例えば 2 次微分スペクトルを差し引くことにより子機と親機の差スペクトルを求め、その差スペクトルを子機で測定する個々の測定対象試料の 2 次微分スペクトルから差し引くことにより、子機の応答特性を親機の応答特性に一致させる方法を提供する。尚、2 次微分スペクトルを採用することにより、ベースラインのシフトが無くなるというメリットがある。

【0008】

前記標準物質のスペクトルとしては、測定対象試料のスペクトルあるいは二次微分スペクトル、あるいはそれらの平均スペクトルが考えられる。ここで、この平均スペクトルには一個の測定対象試料で複数のスペクトルを測定し平均スペクトルを求める場合と、複数の試料で複数のスペクトルを測定し平均スペクトルを求める場合とが想定される。

【0009】

近赤外分光法を応用した装置は光線、分光器およびセンサーから構成される。これらの波長特性および輝度・感度は個体ごとに微妙に異なっており、その総合的な特性である分

光装置応答特性も装置毎に微妙に異なる。また、分光器の波長のズレも発生する。しかし、分光装置応答特性は光源・分光器・センサーが決定されれば各装置固有のものである。

【0010】

従って、子機の各波長における吸光度値の親機とのズレは測定する個々の試料で同様に発生するため、各波長における吸光度値のズレを個々の試料のスペクトル、例えば2次微分スペクトルから差し引くことにより、分光装置応答特性の違いから発生するスペクトル歪みを補正することが可能となる。

【発明の効果】

【0011】

本発明によれば、例えば果実糖度選別機の場合、基準となる選別ライン（親機）で開発した糖度用検量線をその他の複数の選別ライン（子機）への移設が容易になり、ライン間差がなくなり、選別機の信頼性が向上する。また、選別機のメンテナンスが容易になり、ライン間差を補正するための現場での重労働から解放されるという効果がある。

【発明を実施するための最良の形態】

【0012】

以下に本発明の実施の最良の形態を説明する。図1は、本発明実施例のひとつであり、リンゴの果実糖度選別機の例である。該選別機には光源にタングステンランプ、分光器に回折格子、センサーにダイオードアレイ検出器が用いられている。

【0013】

図1の(1)における親機によるモデルの作成の段階では、被測定体の複数の試料（リンゴ）1を、まず親機のセンサー2で測定し、親機の2次微分スペクトル3を得る。次に、前記複数の試料（リンゴ）1の化学分析値4を求める。前記2次微分スペクトル3と前記化学成分値4のデータを基に重回帰分析等ケモメトリックスの方法によりモデル5を得る。

【0014】

図1の(2)における親機と子機の分光特性の差を求める段階では、被測定体の複数の試料（リンゴ）6を、まず親機のセンサー2で測定して、親機の2次微分スペクトルの平均スペクトル7を得る。次に、子機のセンサー8で同じ被測定体の複数の試料（リンゴ）6を測定して、子機の2次微分スペクトルの平均スペクトル9を得る。更に該子機の平均スペクトル9から前記親機の平均スペクトル7を引いて、2次微分値の差スペクトル10を得る。

図1の(3)における子機の分光特性の平準化の段階では、被測定体の個々の試料（リンゴ）11を子機のセンサー8で測定して、子機の2次微分スペクトル12を測定して、前記2次微分スペクトル12から前記差スペクトル10を差し引くことによって得られる平準化2次微分スペクトル13を得る。該平準化2次微分スペクトル13に前記モデル5を適用することにより、目的とする化学成分値14を得る。

【0015】

図2は分散型近赤外装置（NIR Systems社製、NIRS6500）2台（近赤外装置AおよびBとよぶ。）で測定したリンゴ（品種：ふじ）の近赤外2次微分スペクトルである。該近赤外装置には光源にタングステンランプ、分光器に回折格子、センサーにシリコン検出器が用いられている。

【0016】

近赤外装置Aで測定した100個のリンゴスペクトルの2次微分値および糖度（Brix値）を基に重回帰により次式のモデルを開発した。

$$C=16.035-266.386D2A(906)+1351.578D2A(870) \quad (1)$$

)

ここで、CはBrix値、D2A(906)及びD2A(870)はそれぞれ906nm及び870nmにおけるスペクトルの2次微分値である。

【0017】

前記(1)式のモデルを近赤外装置Bで測定したスペクトルに適応した結果を図3に示

す。この場合、 -0.42° Brixの負のバイアスが発生することが分かる。

【0018】

図4は、近赤外装置Bで測定した前記100個のリンゴの2次微分スペクトルの平均スペクトルから近赤外装置Aの平均スペクトルを差し引くことにより得られる差スペクトルである。同図はモデルに使用する860nm～910nmの波長範囲を示したものである。同波長領域において近赤外装置Bの2次微分値は近赤外装置Aのそれより僅かに大きいことが分かる。906nmでは0.0021515、870nmでは0.0008103大きい。従って、近赤外装置Bの906nm及び870nmにおける2次微分値をそれぞれ $D2A(906)_B$ 及び $D2A(870)_B$ とすると、補正した値は次式で求められる。

$$D2A(906)=D2A(906)_B - 0.0021515$$

$$D2A(870)=D2A(870)_B - 0.0008103 \quad (2)$$

(2)式の値を(1)式のモデルに代入することにより、近赤外装置Aで開発したモデルを近赤外装置Bで測定したスペクトルに適用することが可能となる。

【0019】

図5は図3で示したデータを上述した方法で補正して再計算した結果である。バイアスは 0.05° Brixとなり、分光装置応答特性の違いから生ずる誤差の発生がほぼ解消された。この改善度は表1の線形補正、多項式補正の校正結果データと比較しても明らかである。

【0020】

図6は子機で測定した2次微分スペクトルの平均スペクトルから親機で測定した2次微分スペクトルの平均スペクトルを差し引いて得られる差スペクトル、および親機の平均スペクトルを850～1050nmの波長領域で一緒に示したものである。該差スペクトルを $\Delta A(\lambda)$ 、子機で測定した測定対象試料の2次微分スペクトルを $S_B(\lambda)$ とすると、平準化2次微分スペクトル $S_C(\lambda)$ は次式で示される。

$$S_C(\lambda) = S_B(\lambda) - \Delta A(\lambda) \quad (3)$$

ここで、 λ は波長 (nm) である。

【産業上の利用可能性】

【0021】

本発明による分光装置応答特性の平準化は、例えばベルトコンベアにより移動する果実のスペクトルを測定し、得られる糖度などの化学成分値で果実を選別するラインに応用することができる。

【図面の簡単な説明】

【0022】

【図1】 リンゴ果実糖度選別機の例

【図2】 近赤外装置A及びBで測定したリンゴの2次微分スペクトル

【図3】 近赤外装置Aで開発したモデルを近赤外装置Bのスペクトルに適用した例

【図4】 近赤外装置Bで測定したリンゴの2次微分スペクトルから近赤外装置Aのそれを差し引いた差スペクトル

【図5】 近赤外装置Aで開発したモデルを近赤外装置Bの平準化スペクトルに適用した例

【図6】 子機で測定した2次微分スペクトルの平均スペクトルから親機で測定した2次微分スペクトルの平均スペクトルを差し引いて得られる差スペクトル、および親機の平均スペクトル

【符号の説明】

【0023】

- 1 . . . モデル作成時の試料 (リンゴ)
- 2 . . . 糖度選別機 (親機)
- 3 . . . 2次微分スペクトル
- 4 . . . 被測定体の試料 (リンゴ) の化学成分値
- 5 . . . モデル

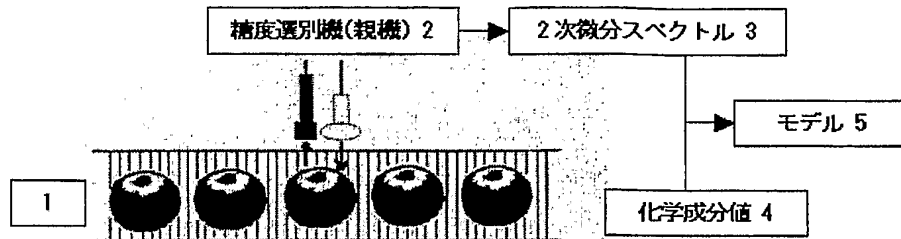
- 6 . . . 差スペクトル測定時の試料（リンゴ）
- 7 . . . 親機で測定した試料 6 の 2 次微分スペクトルの平均スペクトル
- 8 . . . 糖度選別機（子機）
- 9 . . . 子機で測定した試料 6 の 2 次微分スペクトルの平均スペクトル
- 1 0 . . . 差スペクトル
- 1 1 . . . 糖度選別時の個々の試料（リンゴ）
- 1 2 . . . 子機で測定した個々の試料の 2 次微分スペクトル
- 1 3 . . . 2 次微分スペクトル 1 2 から差スペクトル 1 0 を差し引いた平準化 2 次微分
スペクトル
- 1 4 . . . 平準化スペクトル 1 3 にモデル 5 を適用して得られる化学成分値
- 1 5 . . . 親機で測定した 2 次微分スペクトルの平均スペクトル
- 1 6 . . . 子機で測定した 2 次微分スペクトルの平均スペクトルから親機で測定した 2
次微分スペクトルの平均スペクトルを差し引くことにより得られる差スペクトル

【書類名】 図面

【図 1】

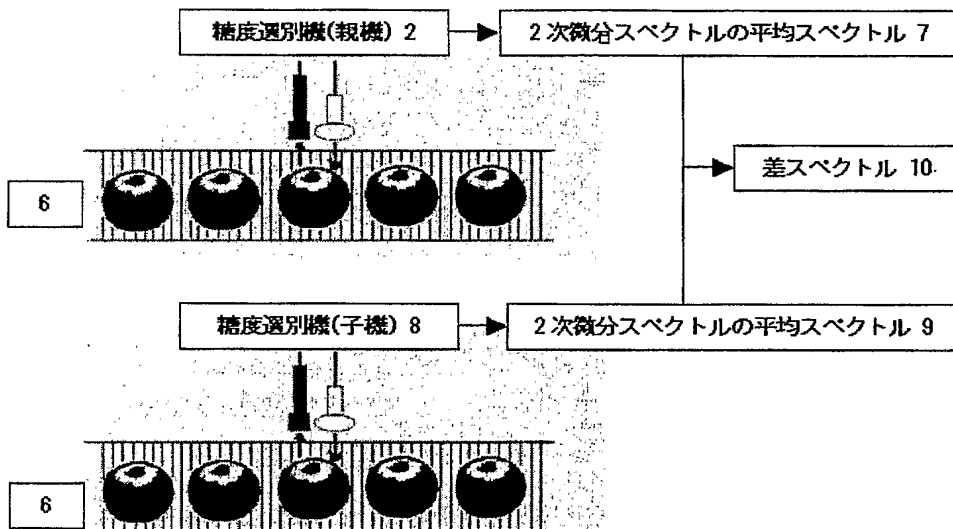
(1) 親機によるモデルの作成:

親機により測定した2次微分スペクトルと化学成分値を基にモデルを作成する。



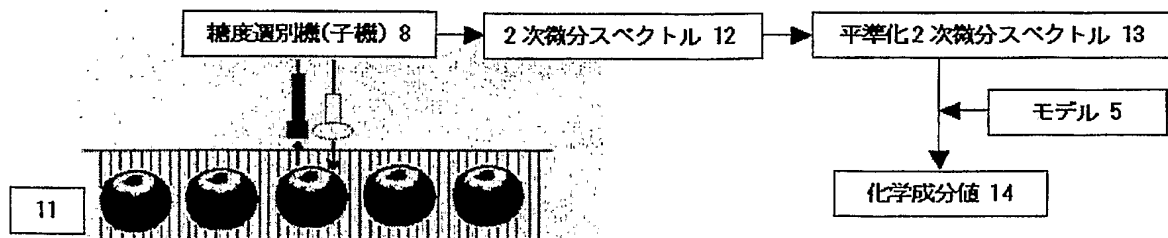
(2) 親機と子機の分光特性の差(差スペクトルの測定)

子機の2次微分スペクトルの平均スペクトルから親機のそれを差し引くことにより得られる差スペクトルを求める。

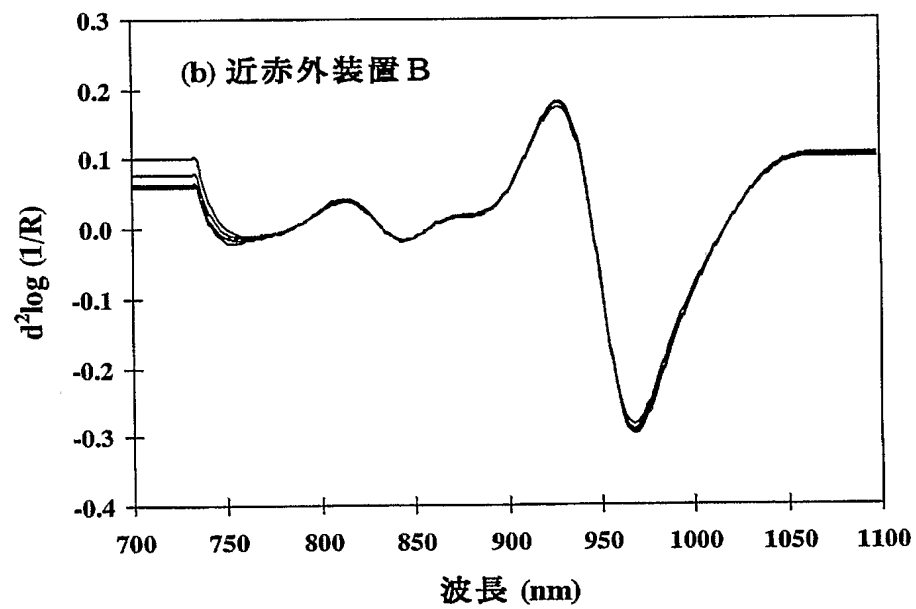
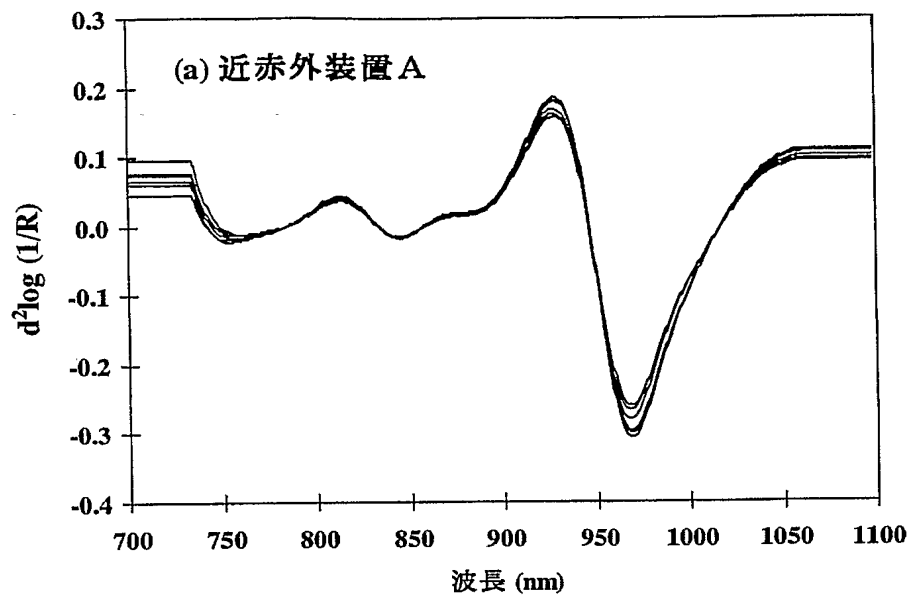


(3) 子機の分光特性の平準化:

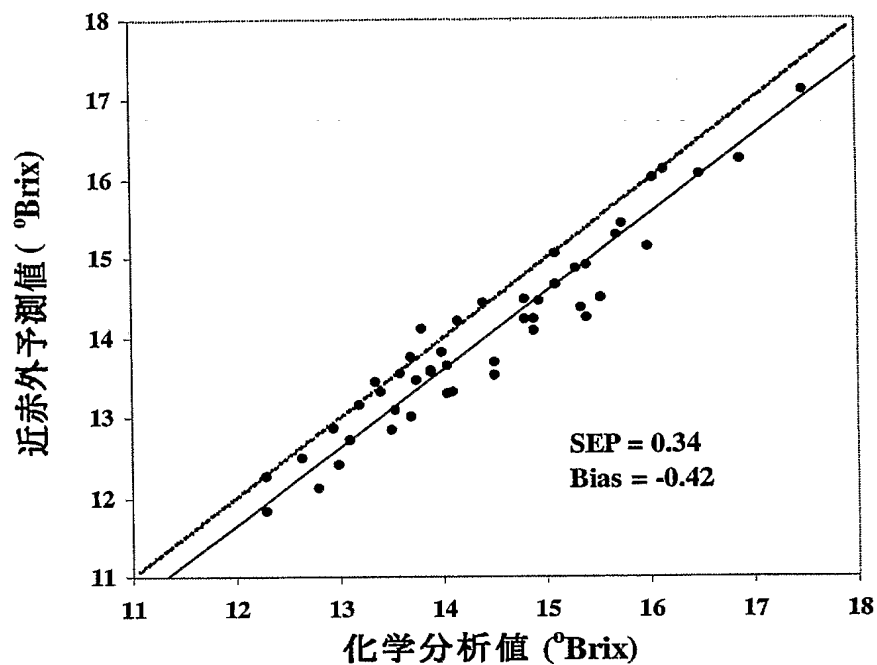
子機により測定する個々の測定試料の2次微分スペクトルから(2)で求めた差スペクトルを差し引くことにより子機の分光特性を平準化する。平準化したスペクトルに(1)で得られたモデルを適用することにより親機と同等な化学成分値が推定できる。



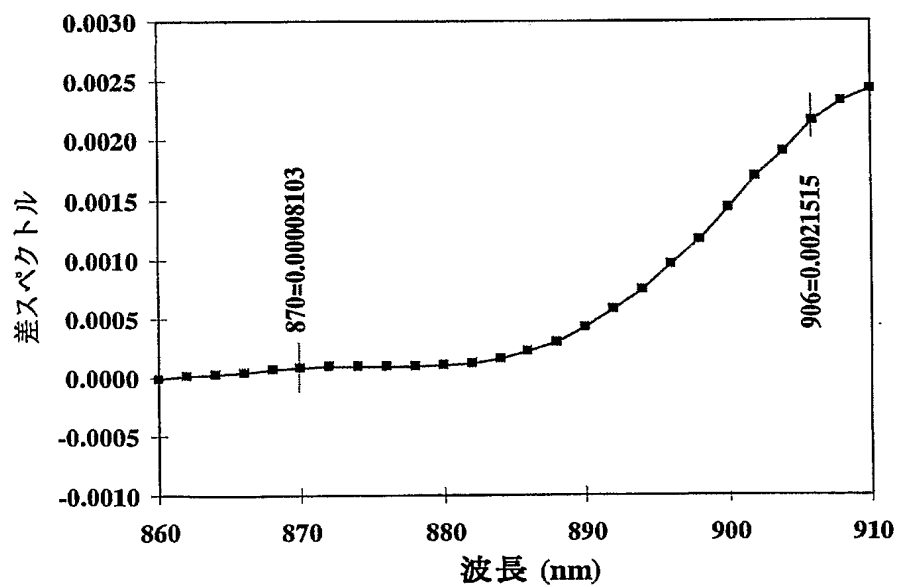
【図 2】



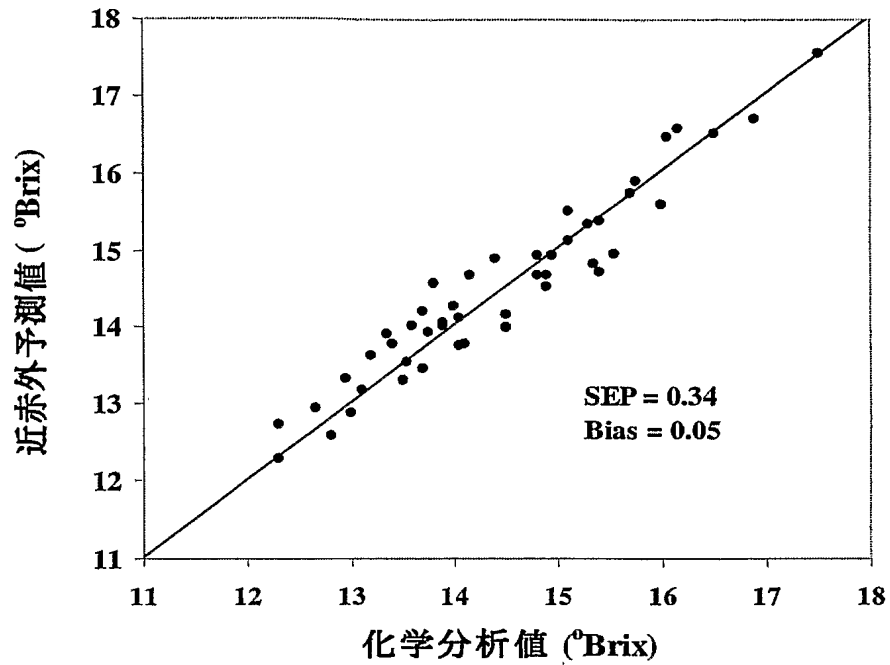
【図 3】



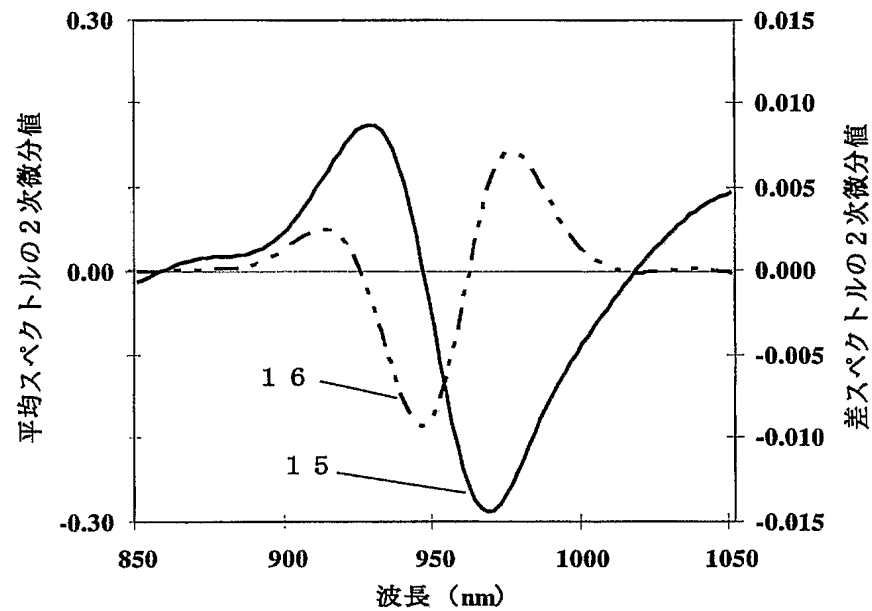
【図 4】



【図 5】



【図 6】



【書類名】 要約書**【要約】**

【課題】 光源・分光器・センサーの応答特性の違いから生ずる分光装置応答特性の違いを補正する分光装置応答特性の平準化法を提供する。

【解決手段】 子機で測定した標準物質のスペクトルから親機で測定した同物質のスペクトルを差し引くことにより子機と親機の差スペクトルを求め、その差スペクトルを子機で測定する個々の測定対象試料のスペクトルから差し引くことにより、子機の応答特性を親機の応答特性に一致させる方法を提供する。

光源、分光器およびセンサーから構成される近赤外分光法を応用した装置において、子機の各波長における吸光度値の親機とのズレは測定する個々の試料で同様に発生するため、各波長における吸光度値のズレを個々の試料のスペクトルから差し引くことにより、分光装置応答特性の違いから発生するスペクトル歪みを補正することが可能となる。

【採用図面】 図 6

認定・付加情報

特許出願の番号	特願 2004-058443
受付番号	50400343953
書類名	特許願
担当官	第一担当上席 0090
作成日	平成16年 3月 4日

<認定情報・付加情報>

【特許出願人】

【識別番号】	501145295
【住所又は居所】	茨城県つくば市観音台2丁目1番地12
【氏名又は名称】	独立行政法人食品総合研究所

【代理人】

【識別番号】	100085257
【住所又は居所】	東京都千代田区麹町5丁目7番地 秀和紀尾井町 TBRビル922号
【氏名又は名称】	小山 有

特願 2 0 0 4 - 0 5 8 4 4 3

ページ : 1

出 願 人 履 歴 情 報

識別番号 [5 0 1 4 0 7 2 1 8]

1. 変更年月日 2 0 0 1 年 1 1 月 2 7 日
[変更理由] 識別番号の二重登録による抹消
[統合先識別番号] 5 0 1 1 4 5 2 9 5
住 所 茨城県つくば市観音台2丁目1番地12
氏 名 独立行政法人食品総合研究所

特願 2 0 0 4 - 0 5 8 4 4 3

ページ : 2/E

出 願 人 履 歴 情 報

識別番号 [5 0 1 1 4 5 2 9 5]

1. 変更年月日 2 0 0 1 年 1 1 月 2 7 日
[変更理由] 識別番号の二重登録による統合
[統合元識別番号] 5 0 1 4 0 7 2 1 8
住 所 茨城県つくば市観音台 2 丁目 1 番地 1 2
氏 名 独立行政法人食品総合研究所